

电子鼻联合化学计量学鉴别沉香精油的不同产地及提取方式

李慧婷, 潘 登, 黄小英, 余思媛, 龚梦雅, 何 华, 陈 义*, 杨 明*

江西中医药大学 现代中药制剂教育部重点实验室, 江西 南昌 330004

摘要: 目的 采用电子鼻联合化学计量学方法, 系统分析不同产地及提取方式沉香 *Aquilariae Lignum Resinatum* 精油的挥发性成分差异, 旨在构建一种快速鉴别沉香精油来源与提取工艺的新方法。方法 收集来自 7 个主要产地、2 种提取方式的 38 批沉香精油样品, 采用气相色谱-质谱联用 (gas chromatography-mass spectrometry, GC-MS) 技术解析其化学组成, 并利用电子鼻获取其整体香气指纹信息。综合运用主成分分析 (principal component analysis, PCA)、偏最小二乘-判别分析 (partial least squares-discriminant analysis, PLS-DA) 及正交偏最小二乘-判别分析 (orthogonal partial least squares-discriminant analysis, OPLS-DA) 对多源数据进行模式识别。结果 GC-MS 分析表明所有样品的共有主要成分为苜蓿丙酮、沉香螺醇、去氢呋喃酮和 2-(2-苯乙基)色酮。通过变量重要性投影 (variable importance projection, VIP>1) 筛选出 2-(2-苯乙基)色酮、6-甲氧基-2-(2-苯乙基)色酮等 7 种关键差异性化合物。电子鼻响应值数据的 PCA 结果显示, 能较好地与沉香精油样品的产地或提取方法进行关联; 所建立的 OPLS-DA 判别模型性能优异, 产地判别模型 $R_x^2=0.839$, $R_y^2=0.794$, $Q^2=0.572>0.500$, 提取方式判别模型 $R_x^2=0.790$, $R_y^2=0.647$, $Q^2=0.633>0.500$, 能有效对沉香精油进行分类。结论 成功将电子鼻快速判别与 GC-MS 成分分析相结合, 证实该联合策略能准确鉴别沉香精油的提取方法与产地, 并明确了其物质基础, 为沉香精油的分类鉴别提供了一种高效、可靠的新方法。

关键词: 沉香精油; 电子鼻; 化学计量学; 产地; 提取方式; GC-MS; 主成分分析; 偏最小二乘-判别分析; 正交偏最小二乘-判别分析; 苜蓿丙酮; 沉香螺醇; 去氢呋喃酮; 2-(2-苯乙基)色酮; 变量重要性投影

中图分类号: R283.6 文献标志码: A 文章编号: 0253-2670(2026)11-4135-12

DOI: 10.7501/j.issn.0253-2670.2026.11.006

Identification of *Aquilariae Lignum Resinatum* essential oils from different origins and extraction methods using electronic nose combined with chemometrics

LI Huiting, PAN Deng, HUANG Xiaoying, YU Siai, GONG Mengya, HE Hua, CHEN Yi, YANG Ming

Key Laboratory of Modern Preparation of Traditional Chinese Medicine, Ministry of Education, Jiangxi University of Chinese Medicine, Nanchang 330004, China

Abstract: Objective To systematically analyze the differences in volatile components of Chenxiang (*Aquilariae Lignum Resinatum*) essential oil (AEO) from various origins and extraction methods using an electronic nose combined with chemometrics, aiming to establish a novel method for rapid identification of AEO origins and extraction processes. **Methods** A total of 38 batches of AEO samples were collected from seven major origins using two extraction methods. Their chemical compositions were analyzed using gas chromatography-mass spectrometry (GC-MS), while overall aroma fingerprint information was obtained via electronic nose. Principal component analysis (PCA), partial least squares-discriminant analysis (PLS-DA), and orthogonal partial least squares-discriminant analysis (OPLS-DA) were comprehensively applied for pattern recognition of multi-source data. **Results** GC-MS analysis revealed that the common major components in all samples were benzylacetone, agarospirol, dehydrofuranone, and 2-(2-phenylethyl)chromone. Seven key differential compounds, including 2-(2-phenylethyl)chromone and 6-methoxy-2-(2-phenylethyl)chromone, were screened through variable importance projection (VIP > 1). The PCA results of the electronic nose response values show a good correlation with

收稿日期: 2025-12-22

基金项目: 江西省“赣鄱英才”创新领军人才项目 (gpyc20240037); 江西省自然科学基金资助项目 (20242BAB20456); 国家自然科学基金资助项目 (82404878); 海南省重点研发项目 (ZDYF2025SHFZ055); 江西中医药大学博士科研启动基金项目 (2024BSZR016); 江西中医药大学中药药研实践创新训练项目 (24KYCX-ZD014)

作者简介: 李慧婷, 讲师, 博士, 从事中药新剂型、新技术、新工艺研究。Tel: (0791)87118658 E-mail: lihuiting19@163.com

*通信作者: 陈 义, 讲师, 博士, 从事中药化学研究。Tel: (0791)87118797 E-mail: chenysky@126.com

杨 明, 教授, 博士生导师, 从事中药新剂型、新技术、新工艺研究。Tel: (0791)87119032 E-mail: yangming16@126.com

the origin or extraction method of AEO samples. The established OPLS-DA discriminant model exhibited excellent performance: the origin discriminant model achieved $R_x^2 = 0.839$, $R_y^2 = 0.794$, $Q^2 = 0.572 > 0.500$, and the extraction method discriminant model achieved $R_x^2 = 0.790$, $R_y^2 = 0.647$, $Q^2 = 0.633 > 0.500$, which can effectively classify AEO samples. **Conclusion** This study successfully combined the rapid identification of electronic nose with GC-MS component analysis, which confirmed that the combined strategy could accurately identify the extraction method and geographical origins of AEO, and clarified its material basis, providing an efficient and reliable new method for the classification and identification of AEO.

Key words: *Aquilariae Lignum Resinatum* essential oil; electronic nose; chemometrics; origin; extraction method; GC-MS; principal component analysis; partial least squares-discriminant analysis; orthogonal partial least squares-discriminant analysis; benzylacetone; agarospirol; dehydrofuranone; 2-(2-phenylethyl)chromone; variable importance projection

沉香为瑞香科植物白木香 *Aquilaria sinensis* (Lour.) Gilg 含有树脂的木材^[1], 是中国、日本、印度及东南亚等多地沿用已久的传统名贵香料与药材。早在南北朝时, 陶弘景在《名医别录》中已将其列为上品^[2], 彰显其自古享有的“香中之王”盛誉,《新修本草》中也详细记载了沉香的产地、性味、功效主治^[3]。沉香气味芳香, 性微温, 味辛、苦, 归脾、胃、肾经, 功能行气止痛、温中止呕、纳气平喘, 临床常用于胸腹胀闷疼痛、胃寒呕吐呃逆、肾虚气逆喘急等症^[1]。现代研究表明, 挥发油是沉香发挥药效的关键部位之一, 其主要包含芳香族、倍半萜及色酮类成分, 具有抗抑郁、镇静催眠、改善脑卒中以及调节心脑血管和消化功能等多种药理活性^[4-8], 展现出极高的药用价值与在医药、食品及化妆品领域的广阔应用前景。沉香精油 (*Aquilariae Lignum Resinatum* essential oil, AEO) 的成分特征深受其地理来源与提取工艺的影响。

目前, 针对沉香精油的分析方法主要依赖于气相色谱 (gas chromatography, GC)、气相色谱-质谱联用 (gas chromatography-mass spectrometry, GC-MS) 等仪器分析技术^[9-11]。这些方法虽能精确鉴定化学成分, 但通常涉及复杂的样品前处理流程, 且分析耗时较长。近年来, 仿生传感技术, 特别是被称为“人工嗅觉系统”或“气味指纹分析技术”的电子鼻, 发展迅速^[12-13], 该技术通过模拟人体嗅觉, 利用气体传感器阵列对样品的整体挥发性信息进行快速、无损的响应与识别^[14], 已成功应用于食品检测^[15-19]、中药鉴定^[20-22]、环境监测^[23-25]等领域。香气特征是评价精油质量的重要指标, 因此, 通过电子鼻等具有传感阵列元件的仪器对精油气味进行客观评价, 对于鉴定精油质量有重要意义^[26]。它们可对不同样品香气信息进行对比分析, 并可通过采集标样信息建立数据库, 结合化学计量学方法对未知样品进行定性和定量评价^[27], 与人体感官评价

相比更快速、精准、简便。赵玉珍等^[28]采用 PEN 型电子鼻识别不同产地旋覆花气味, 并结合主成分分析 (principal component analysis, PCA) 和偏最小二乘-判别分析 (partial least squares-discriminant analysis, PLS-DA) 对不同产地间挥发性成分差异性进行分析, 结果显示, 顶空气相色谱-质谱法 (headspace injection gas chromatography-mass spectrometry, HS-GC-MS) 联合电子鼻能较好区分不同产地旋覆花。辛力等^[29]运用 HS-GC-MS、色差仪与电子鼻等智能感官技术, 并结合 PCA 和正交偏最小二乘-判别分析 (orthogonal partial least squares-discriminant analysis, OPLS-DA) 对比分析陈皮在赤石脂炒制前、后挥发性成分、颜色及气味的变化, 共鉴定出 112 种挥发性成分, 筛选出 7 种差异显著成分 (α -蒎烯、 β -月桂烯等), 电子鼻分析结果显示, 陈皮土炒后 4 个传感器响应值明显升高 ($P < 0.05$), 2 个明显降低 ($P < 0.05$), 电子鼻可对挥发性成分进行快速分类判别。

然而, 将电子鼻技术系统性地应用于区分沉香精油的地理来源与提取方式的研究仍待深入。尽管电子鼻能够快速获取样品的整体气味信息, 但仅凭其响应值难以直接阐明导致分类差异的具体化学成分, 无法建立“气味-成分”之间的内在关联^[30]。因此, 集成电子鼻的快速判别优势与 GC-MS 的精准成分分析能力, 并结合化学计量学进行多维数据解析, 有望构建一种更为完善的沉香精油分类与溯源新策略。基于此, 本研究收集了来自 7 个不同产地、2 种主要提取方式 [水蒸气蒸馏法 (steam distillation extraction, SDE) 与超临界流体萃取法 (supercritical fluid extraction, SFE)] 的 38 批沉香精油样品, 联合运用电子鼻与 GC-MS 技术, 并结合 PCA、PLS-DA 及 OPLS-DA 等化学计量学方法, 旨在探究不同产地与提取方式沉香精油的气味与化学成分差异, 筛选并鉴定导致其差异的关键挥发

性成分,为沉香精油的分类与溯源提供一种基于化学成分特征的快速分析新方法。

1 仪器与材料

1.1 仪器

7890A/5975C 型气相色谱-质谱联用仪,美国安捷伦科技有限公司;BSA224S-CW 型电子天平,赛多利斯科学仪器(北京)有限公司;Super Nose 型电子鼻,上海瑞玢智能科技有限公司。

1.2 样品

本研究共收集 38 批沉香精油样品,详细信息见表 1。样品涵盖中国海南、中国广东、中国广西、中国香港、柬埔寨、老挝和泰国共 7 个产地,提取方式包括 SDE 与 SFE。所有样品购自市场后,均于 4 °C 条件下避光保存,并依次编号为 S1~S38。

2 方法和结果

2.1 基于 GC-MS 技术的沉香精油样品中挥发性成分分析

2.1.1 GC-MS 检测 取各沉香精油样品各 100 μ L,分别放入 10 mL 量瓶中,加无水乙醇溶解,无水硫酸钠脱水,采用 0.22 μ m 的微孔滤膜滤过,续滤液即为待测样品。

采用 GC-MS 法对其进行成分检测,GC 条件:

表 1 沉香精油样品的产地来源和提取方法信息

Table 1 Information on origins and extraction methods of AEO samples

序号	产地	提取方式	序号	产地	提取方式
S1	中国广东	SFE	S20	中国广东	SFE
S2	中国海南	SDE	S21	中国广东	SFE
S3	中国香港	SFE	S22	中国海南	SDE
S4	中国海南	SFE	S23	中国海南	SDE
S5	中国广东	SFE	S24	中国广东	SFE+SDE
S6	中国广东	SFE	S25	中国广东	SFE
S7	中国广东	SFE	S26	柬埔寨	SFE
S8	中国海南	SDE	S27	老挝	SDE
S9	中国广东	SDE	S28	中国海南	SDE
S10	中国广东	SDE	S29	中国广东	SDE
S11	中国广西	SDE	S30	中国海南	SDE
S12	中国海南	SDE	S31	中国广东	SFE
S13	老挝	SDE	S32	中国广东	SFE
S14	中国海南	SDE	S33	中国广东	SDE
S15	中国海南	SDE	S34	中国广西	SDE
S16	老挝	SDE	S35	中国广东	SDE
S17	泰国	SDE	S36	中国海南	SDE
S18	中国海南	SDE	S37	中国广东	SFE
S19	中国海南	SDE	S38	中国广东	SFE

采用 Agilent HP-5MS (30 m \times 250 μ m, 0.25 μ m) 毛细管色谱柱,以高纯度 He (99.999%) 为载气,进样量 1 μ L,分流比 10:1,体积流量 1 mL/min,升温程序:初始温度为 60 °C,保持 2 min,以 10 °C/min 升至 140 °C,再以 1 °C/min 升至 180 °C,保持 2 min,最后以 20 °C/min 升至 300 °C,保持 10 min。MS 条件:EI 离子源,电子能量 70 eV,离子源温度 230 °C,质谱四极杆温度 150 °C,界面温度 250 °C,溶剂延迟 3 min,质量扫描模式为全扫描,扫描范围 m/z 30~650。

2.1.2 挥发性成分分析 取沉香精油样品,按照“2.1.1”项下条件检测,并采用 NIST 17.0 质谱数据库鉴定化学成分。结果表明,不同产地、提取方式的样品化学成分具有很大差异,38 个沉香精油样品主要共有成分为苯基丙酮、沉香螺醇、去氢呋喃酮和 2-(2-苯乙基)色酮,其他各个成分在不同的产地中均体现了明显的差异性。38 个沉香精油样品中所有已鉴定化合物的色谱图见图 1,代表性产地、代表性提取方式的样品,GC-MS 成分分析结果如表 2、3 所示。

2.1.3 基于挥发性成分的不同沉香精油样品的 PLS-DA

(1) 基于 PLS-DA 筛选不同产地沉香精油样品的差异挥发性化合物:由图 2-A 和表 4 可知,共筛选出 11 种 VIP>1 的标志性差异化合物,分别为 2-(2-苯乙基)色酮、6-甲氧基-2-(2-苯乙基)色酮、3,5-二甲氧基-1,2-二氢萘、2-[(2*S*,4*aR*)-4*a*,8-二甲基-1,2,3,4,4*a*,5,6,7-八氢萘-2-基]丙-2-醇、(2*Z*,6*E*)-3,7-二甲基-9-(1-甲基亚乙基)-2,6-环癸二烯-1-酮、6,7-二甲氧基-2-(2-苯乙基)色酮、沉香螺醇、2-(4-甲氧基苯乙基)色酮、(+)- γ -桉叶油醇、棕榈酸、去氢呋喃酮,表明这些化合物是不同产地的差异挥发性化合物。

(2) 基于 PLS-DA 筛选不同提取方式沉香精油样品的差异挥发性化合物:为筛选 2 种提取方式沉香精油样品的差异挥发性化合物,对 GC-MS 技术检测到的成分峰数据进行 PLS-DA,并通过变量重要性投影(variable importance projection, VIP)值,筛选出对样本分类贡献大的关键差异化合物(图 2-B 和表 4)。VIP 通过 PLS-DA 载荷图判别所得, VIP 值越大,表明该因素对样本分类的贡献越大,通常 VIP 大于 1 的变量被认为是重要的区分变量。共筛选出 10 种 VIP>1 的标志性差异化合物,分别为 2-(2-苯乙基)色酮、6-甲氧基-2-(2-苯乙基)色酮、去氢

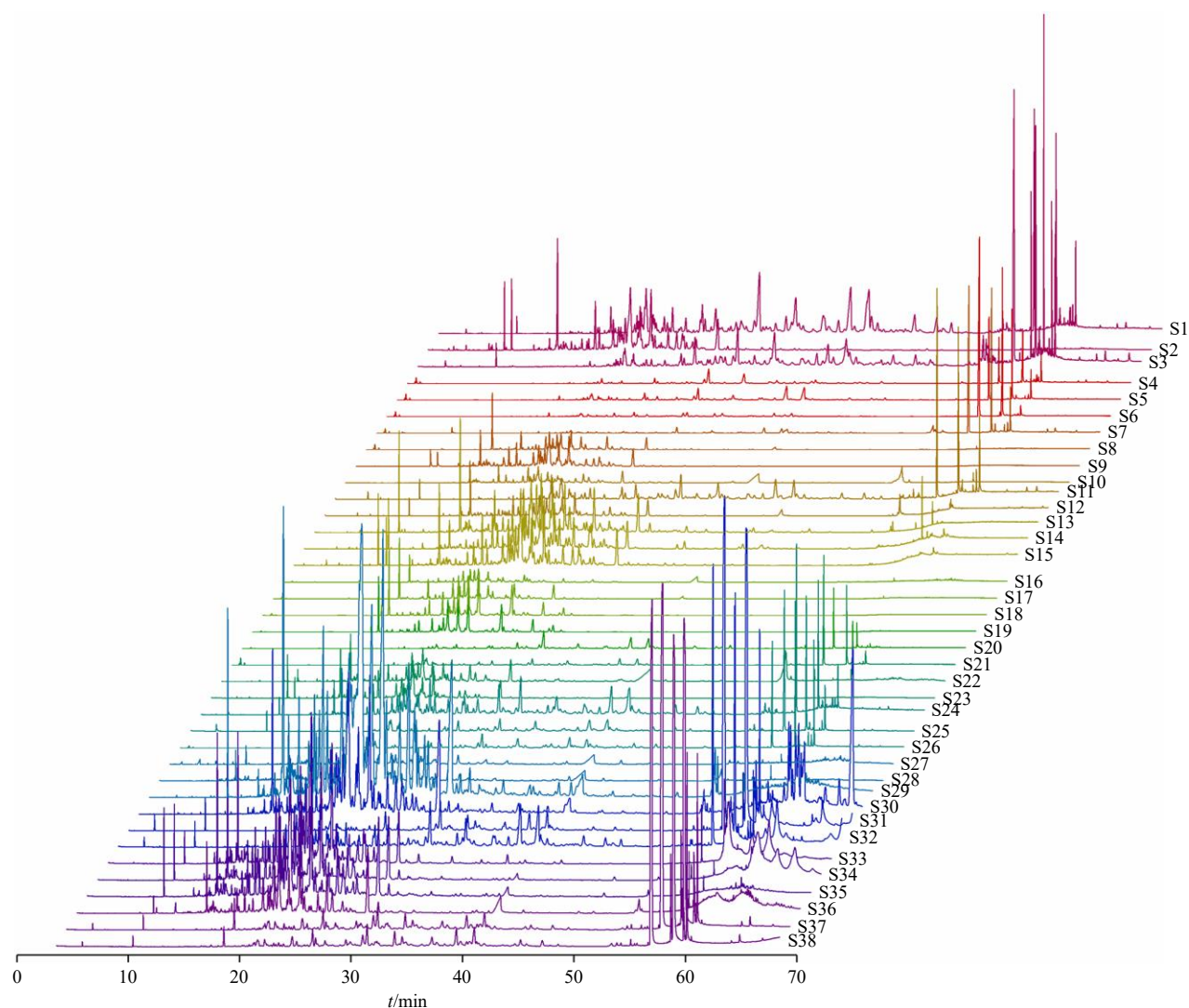


图 1 38个沉香精油样本的 GC-MS 色谱图

Fig. 1 GC-MS chromatogram of 38 AEO samples

表 2 代表性沉香精油样品的 GC-MS 分析

Table 2 GC-MS analysis of representative AEO samples

类别	峰号	t_R / min	化合物名称	分子式	CAS号	相对质量分数/%				
						S3	S13	S31	S34	S36
芳香族	1	5.56	苯甲醛	C ₇ H ₆ O	100-52-7	0.236 0	/	0.319 1	/	/
	2	9.86	苜基丙酮	C ₁₀ H ₁₂ O	2550-26-7	0.499 3	3.488 9	0.497 4	1.364 4	0.578 3
	3	11.18	3-苯丙酸甲酯	C ₁₀ H ₁₂ O ₂	103-25-3	/	0.124 9	/	/	/
	4	16.75	茴香基丙酮	C ₁₁ H ₁₄ O ₂	104-20-1	/	0.947 3	/	/	/
	5	26.12	3,4-二甲基-6-乙基苯酚	C ₁₀ H ₁₄ O	2219-78-5	/	/	1.252 8	0.635 6	/
	6	28.20	去氢呋喃酮	C ₁₅ H ₂₂ O	19598-45-9	0.797 3	5.760 0	/	5.990 4	10.845 6
	7	47.47	1,5-二苯基-3-戊酮	C ₁₇ H ₁₈ O	5396-91-8	/	0.660 0	/	/	/
	8	54.96	1,5-二苯基戊-1-烯-3-酮	C ₁₇ H ₁₆ O	62510-08-1	1.366 4	0.462 8	/	/	/
脂肪酸类	9	11.94	癸酸	C ₁₀ H ₂₀ O ₂	334-48-5	/	/	/	/	0.760 6
	10	40.19	棕榈酸	C ₁₆ H ₃₂ O ₂	57-10-3	4.079 6	/	/	/	6.953 3
	11	53.85	油酸	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	112-80-1	2.032 6	/	/	/	/
	12	53.84	反油酸	C ₁₈ H ₃₄ O ₂	112-79-8	/	/	/	/	1.868 6
	13	54.36	硬脂酸	C ₁₈ H ₃₆ O ₂	57-11-4	0.598 7	/	/	/	/
	14	54.50	亚油酸	C ₁₈ H ₃₂ O ₂	60-33-3	0.701 4	/	/	/	/

表 2 (续)

类别	峰号	<i>t_R</i> / min	化合物名称	分子式	CAS号	相对质量分数/%					
						S3	S13	S31	S34	S36	
倍半萜类	15	12.39	β-榄香烯	C ₁₅ H ₂₄	515-13-9	/	/	/	0.783 0	/	
	16	14.30	g-古芸烯	C ₁₅ H ₂₄	22567-17-5	/	0.717 6	/	/	/	
	17	14.58	β-桉叶烯	C ₁₅ H ₂₄	17066-67-0	/	0.333 0	/	0.299 0	/	
	18	15.12	二氢β-沉香呔喃	C ₁₅ H ₂₆ O	5956-09-2	/	0.778 3	/	0.275 9	/	
	19	15.33	大根香叶烯	C ₁₅ H ₂₄	15423-57-1	/	/	/	0.664 5	/	
	20	18.50	α-白菖考烯	C ₁₅ H ₂₀	21391-99-1	/	0.423 6	/	/	/	
	21	18.52	木香醇	C ₁₅ H ₂₄ O	515-20-8	/	/	/	/	0.649 1	
	22	19.66	g-桉叶油醇	C ₁₅ H ₂₆ O	1209-71-8	/	2.809 2	/	5.635 6	2.806 0	
	23	19.84	沉香螺醇	C ₁₅ H ₂₆ O	1460-73-7	0.360 3	3.760 8	/	2.318 5	2.737 7	
	24	20.47	β-桉叶醇	C ₁₅ H ₂₆ O	473-15-4	0.874 4	/	/	3.708 6	/	
	25	20.57	白菖烯	C ₁₅ H ₂₄	17334-55-3	1.498 6	6.512 8	/	10.332 6	/	
	26	22.69	茅苍术醇	C ₁₅ H ₂₆ O	23811-08-7	0.283 4	1.353 1	/	/	/	
	27	29.99	α-木香醇	C ₁₅ H ₂₄ O	65018-15-7	/	/	/	0.927 4	/	
	有机硅类	28	28.69	2,3-二氢-1,1-二丙基-1-硅-1 <i>H</i> -萘	C ₁₄ H ₂₂ Si	61141-63-7	/	2.138 8	/	1.925 0	/
	色酮类	29	57.07	2-(2-苯乙基)色酮	C ₁₇ H ₁₄ O ₂	61828-53-3	16.295 9	0.223 5	37.768 7	0.319 7	0.305 3
		30	58.38	2-(4-甲氧基苯乙基)色酮	C ₁₈ H ₁₆ O ₃	92911-82-5	/	/	/	0.307 0	0.178 5
		31	58.98	6-甲氧基-2-(2-苯乙基)色原酮	C ₁₈ H ₁₆ O ₃	84294-89-3	10.663 5	/	/	/	/
		32	60.90	6,7-二甲氧基-2-(苯乙基)色酮	C ₁₉ H ₁₈ O ₄	84294-87-1	3.540 8	/	/	/	/
	酯类	33	57.85	邻苯二甲酸二(2-乙基)己酯	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	117-81-7	3.383 9	0.719 0	/	/	1.451 7
		34	59.24	对苯二甲酸二辛酯	C ₂₄ H ₃₈ O ₄	6422-86-2	8.194 8	/	/	/	/
	甾醇类	35	58.79	γ-谷甾醇	C ₂₉ H ₅₀ O	83-47-6	0.525 6	/	0.566 1	/	/
		36	63.29	豆甾醇	C ₂₉ H ₄₈ O	83-48-7	0.276 5	/	/	/	/
		37	65.87	豆甾-4-烯-3-酮	C ₂₉ H ₄₈ O	1058-61-3	0.577 0	/	/	/	/
	其他	38	16.35	4a,5-二甲基-3-(丙-1-烯-2-基)-1,2,3,4,4a,5,6,7-八氢萘-1-醇	C ₁₅ H ₂₄ O	61847-19-6	/	/	/	/	0.632 9
		39	16.54	卡藜二烯	C ₁₅ H ₂₄	59742-39-1	/	0.253 9	/	/	/
		40	16.64	(5 <i>R</i> ,10 <i>R</i>)-10-甲基-6-亚甲基-2-(丙-2-亚基)螺[4.5]癸-7-烯	C ₁₅ H ₂₂	28908-27-2	/	0.718 7	/	/	/
		41	18.43	愈创醇	C ₁₅ H ₂₆ O	489-86-1	/	/	0.820 5	/	/
42		18.68	1,10-二甲基-2-异丙烯基双环[4.4.0]癸-3,5-二烯	C ₁₅ H ₂₂	997214-09-7	/	0.659 1	/	/	/	
43		19.13	(<i>R</i>)-3,7,11-三甲基-1,6,10-十二碳三烯-3-醇	C ₁₅ H ₂₆ O	17430-12-5	/	0.309 8	/	/	/	
44		19.20	表桉叶油醇	C ₁₅ H ₂₆ O	117066-77-0	/	4.697 9	/	2.934 3	3.684 1	
45		20.04	<i>dl</i> -新异长福烯	C ₁₅ H ₂₄	26783-22-2	0.466 7	/	/	3.550 2	/	
46		21.22	(2 <i>R</i> ,8 <i>R</i> ,8 <i>aS</i>)-1,2,3,4,6,7,8,8 <i>a</i> -八氢α,α,8,8 <i>a</i> -四甲基-2-萘甲醇基]-2-丙醇	C ₁₅ H ₂₆ O	20489-45-6	/	/	/	/	13.130 0	
47		21.22	三甲基异丙苯	C ₁₂ H ₁₈	33991-29-6	/	6.390 4	/	/	/	
48		22.95	长叶烯	C ₁₅ H ₂₄	475-20-7	/	/	/	/	5.825 7	
49		24.98	巴伦西亚橘烯	C ₁₅ H ₂₄	4630-07-3	/	/	/	/	1.471 6	
50		25.55	3-异丙基苯基-2-丁烯-1-醇	/	997176-23-5	/	5.446 4	/	/	/	
51		25.97	八氢-1,1,4,4-四甲基-2,3 <i>b</i> -甲桥-3 <i>bH</i> -环戊并[1,3]环丙并[1,2]苯-7-醇	C ₁₅ H ₂₄ O	74842-43-6	/	1.464 4	/	/	/	
52		25.99	马兜铃烷	C ₁₅ H ₂₂	154098-14-3	/	0.803 9	/	/	/	
53		27.80	3,5,6,7,8,8 <i>a</i> -六氢-4,8 <i>a</i> -二甲基-6-(1-甲基乙烯基)-1 <i>H</i> -萘-2-酮	C ₁₅ H ₂₂ O	1000188-66-5	/	/	/	0.642 1	1.528 1	
54		59.42	角鲨烯	C ₃₀ H ₅₀	111-02-4	/	/	0.830 5	/	/	

“/”表示未检出或匹配度<90%。

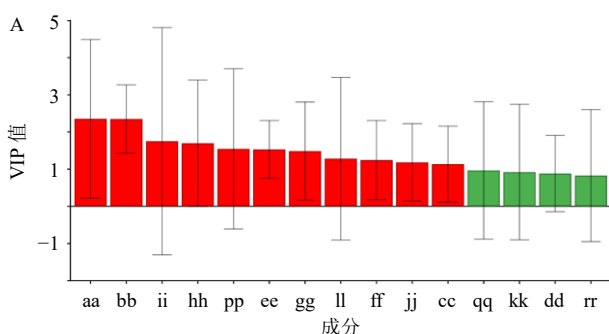
“/” indicates the component was not detected or its matching degree was < 90%.

表3 各类别化合物的相对含量

Table 3 Relative content of various compounds			
类别	相对含量范围/%	类别	相对含量范围/%
芳香族	0.130 8~6.390 4	色酮类	0.048 6~53.346 5
脂肪酸类	0.133 4~6.953 3	酯类	0.124 9~8.194 8
倍半萜类	0.093 2~15.512 7	甾醇类	0.250 2~1.254 7
有机硅类	1.406 0~2.138 8	其他	0.338 5~1.546 2

“相对含量范围”指在 38 批样品中，同一类别所有化合物相对含量之和的最小值与最大值。

“Relative content range” denotes the minimum and maximum values of the sum of relative contents for all compounds within the same category across 38 batches of samples.



aa 为 2-(2-苯乙基)色酮; bb 为 6-甲氧基-2-(2-苯乙基)色酮; cc 为去氢呋喃酮; dd 为白菖烯; ee 为 6,7-二甲氧基-2-(2-苯乙基)色酮; ff 为(+)- γ -桉叶油醇; gg 为沉香螺醇; hh 为 2-[(2*S*,4*aR*)-4*a*,8-二甲基-1,2,3,4,4*a*,5,6,7-八氢萘-2-基]丙-2-醇; ii 为 3,5-二甲氧基-1,2-二氢萘; jj 为棕榈酸; kk 为长叶烯相关衍生物; ll 为 2-(4-甲氧基苯乙基)色酮; mm 为间二甲苯; nn 为苯基丙酮; oo 为茅苍术醇; pp 为(2*Z*,6*E*)-3,7-二甲基-9-(1-甲基亚乙基)-2,6-环癸二烯-1-酮; qq 为异丙基假枯烯; rr 为 β -桉叶醇。

aa is 2-(2-phenylethyl)chromone; bb is 6-methoxy-2-(2-phenylethyl)chromone; cc is (4*aR*,5*S*)-4*a*,5-dimethyl-3-propan-2-ylidene-5,6,7,8-tetrahydro-4*H*-naphthalen-2-one; dd is calarene; ee is 6,7-dimethoxy-2-phenethylchromone; ff is (+)- γ -eudesmol; gg is agarospirol; hh is 2-[(2*S*,4*aR*)-4*a*,8-dimethyl-1,2,3,4,4*a*,5,6,7-octahydronaphthalen-2-yl]propan-2-ol; ii is 3,5-dimethoxy-1,2-dihydronaphthalene; jj is *n*-hexadecanoic acid; kk is longifolene-related derivatives; ll is 2-(4-methoxyphenethyl)chromone; mm is 1,3-dimethyl-benzene; nn is 4-phenyl-2-butanone; oo is hinesol; pp is (2*Z*,6*E*)-3,7-dimethyl-9-(1-methylethylidene)-2,6-cyclodecadien-1-one; qq is isopropyl pseudoguaianolide; rr is β -eudesmol.

图2 基于 GC-MS 结果 PLS-DA 的不同产地 (A) 和不同提取方式 (B) 沉香精油样本的 VIP 分析

Fig. 2 VIP analysis based on PLS-DA of GC-MS results for agarwood essential oil samples from different origins (A) and different extraction methods (B)

最大的差异性化合物，说明色酮类化合物是影响沉香精油分类判定的核心标志成分。

2.2 电子鼻检测与数据分析

2.2.1 电子鼻检测 采用电子鼻仪器对沉香精油香气特征信息进行收集。取 30 μ L 挥发油于进样瓶中，进气体积流量为 0.6 L/min，每个样品分析采样时间为 120 s，传感器自清洗时间为 180 s，通过仪器的 14 个传感器 (N1~N14) 记录响应值数据，每个样品平行测定 3 份，电子鼻 14 个传感器的性能参数信息见表 5。将原始数据导入 Origin 85、SIMCA 14.1 软件中采用 Origin 85 制作雷达图，对样品气味特征进行综合评价，采用 SIMCA 14.1 软件进行 PCA 及 OPLS-DA。

2.2.2 电子鼻传感器响应值数据分析 沉香精油含有多种化学成分，不同成分经电子鼻传感器检测所

得的响应值都显示出自己的特征，电子鼻 14 个传感器的响应值可以归属于精油中不同成分的贡献，根据响应值进行分析，可将成分特征信息与其产地或提取方法进行关联。通过传感器数据建立气味信息雷达图，结果见图 3，不同沉香精油样品的电子鼻响应值差异分析结果见表 6。对不同沉香精油样品电子鼻差异传感器的响应值 (表 6) 进行分析比较，发现不同提取方式和不同产地的差异传感器主要为 N1 和 N8。SDE 所得沉香精油样品在 N1 和 N8 传感器的响应值显著高于 SFE 样品 ($P < 0.05$)；中国海南的沉香精油样品，在 N1 传感器的响应值显著高于中国广东、中国香港及东南亚的沉香精油样品，中国海南的沉香精油样品在 N8 传感器的响应值显著高于中国广东、中国香港。因此，初步推测芳香族类化合物、胺类化合物是区分不同提取方式和产地的

呋喃酮、白菖烯、6,7-二甲氧基-2-(2-苯乙基)色酮、(+)- γ -桉叶油醇、沉香螺醇、2-[(2*S*,4*aR*)-4*a*,8-二甲基-1,2,3,4,4*a*,5,6,7-八氢萘-2-基]丙-2-醇、3,5-二甲氧基-1,2-二氢萘、棕榈酸。其中绝大部分为芳香族化合物，少数为呋喃类、有机酸酯和萜类，说明这几类化合物是不同提取方式沉香精油的差异挥发性化合物。

结合图 2 和表 4，不同产地及不同提取方式的沉香精油样本中，2-(2-苯乙基)色酮、6-甲氧基-2-(2-苯乙基)色酮 2 个色酮类成分，均为对分类结果影响

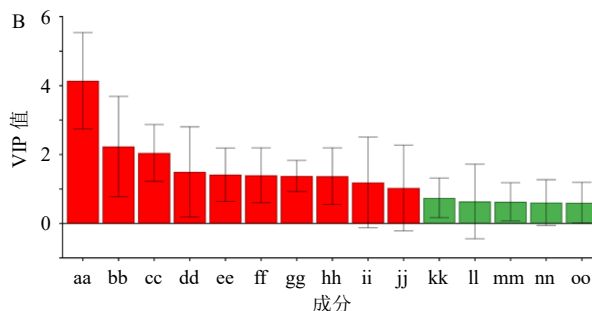


表 4 基于 VIP 值筛选的关键差异挥发性化合物

Table 4 Key differential volatile compounds screened based on VIP values

类型	化合物名称	平均相对含量/%	VIP值		主要贡献
			产地	提取方式	
色酮类	2-(2-苯乙基)色酮	0.048 6~53.346 5	2.353 6	4.131 8	重点存在于SFE样品中
	6-甲氧基-2-(2-苯乙基)色酮	2.779 0~20.513 3	2.349 8	2.233 2	
	6,7-二甲氧基-2-(2-苯乙基)色酮	1.794 6~7.145 8	1.531 2	1.409 2	
	2-(4-甲氧基苯乙基)色酮	0.307 0~11.460 8	1.280 6	-	
倍半萜类	去氢呋喃酮	0.797 3~10.845 6	1.134 8	2.046 6	重点存在于SDE样品中
	沉香螺醇	0.360 3~6.809 1	1.486 9	1.374 1	
	(+)- γ -桉叶油醇	0.475 3~5.635 6	1.244 7	1.390 7	
	(2S,4aR)-2-(4a,8-二甲基-1,2,3,4,4a,5,6,7-八氢萘-2-基)丙-2-醇	0~0.705 6*	1.697 8	1.372 5	
	白菖烯	0.093 4~15.512 7	-	1.487 6	
脂肪酸	棕榈酸	1.038 5~18.901 8	1.182 0	1.041 9	SDE样品中出现较高含量
芳香烃	3,5-二甲氧基-1,2-二氢萘	0~0.850 0*	1.753 1	1.258 5	在中国海南样品中出现较高含量
	(2Z,6E)-3,7-二甲基-9-亚异丙基环癸-2,6-二烯-1-酮	0.804 9~5.052 9	1.546 5	-	

“-”表示在该模型中VIP值 ≤ 1 ; *为估算值或单一样品检出值。

“-” indicates a VIP value ≤ 1 in this model; * denotes estimated values or single-sample detection values.

表 5 电子鼻传感器阵列 (N1~N14) 及性能描述

Table 5 Electronic nose sensor arrays (N1—N14) and performance description

传感器	化合物种类	传感器	化合物种类
N1	芳香族化合物类	N8	胺类
N2	氮氧化合物、低分子胺类	N9	氢气类
N3	硫化物类	N10	呋喃类
N4	有机酸酯和萜类	N11	挥发性有机化合物
N5	萜类、酯类	N12	硫化物
N6	甾醇类、三萜类	N13	乙烯
N7	脂肪烃含氧衍生物类	N14	内酯、吡嗪类

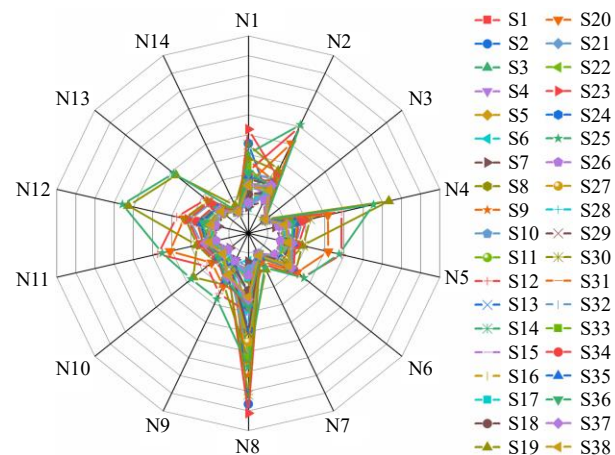


图 3 38 个沉香精油样品的电子鼻雷达图

Fig. 3 Electronic nose radar map of 38 AEO samples

主要化学成分。

2.3 不同沉香精油样品电子鼻数据的 PCA

2.3.1 电子鼻传感器响应值数据 PCA 方法 采用 SIMCA 14.1 软件对其中 36 个沉香精油样本 (预留

不同提取方式、不同产地的 2 个样本做模型预测用于验证) 电子鼻传感器响应值数据进行 PCA, 以分析样本在整个响应面中的分布。采用散点图来表示原始变量的线性组合, 在响应面中, 2 个样本拟合得越紧密, 个体之间的差异就越小, 反之, 表示个体之间差异越大。

2.3.2 沉香精油样本散点分布 36 个沉香精油样品电子鼻数据 PCA 的散点分布图见图 4。分值最高的 2 个主成分得分对光谱信息的贡献率分别为 48.9%、30.8%, 前 3 个主成分的累积贡献率为 82.7%。从不同提取方式的散点图可以观察到样本明显被区分为 2 个聚类, 沿着 X 轴方向, 在 PC1 的散点图上, 提取方式为 SDE 的沉香精油样品聚集在正侧, 而 SFE 的沉香精油样本聚集在负侧, 散点图中出现的这种聚类是基于与沉香精油样品中存在的化学成分组成相关的电子鼻响应值特性的差异。此外, S24 是一个特殊样本, 它是由 SDE 和 SFE 2 种方式混合提取而得, 从 PCA 结果来看, 它明显偏离这 2 个核心区域。从不同产地的散点图可以观察到, 沿 X 轴方向, 在 PC1 的散点图上, 大多数来自中国广东的沉香精油聚集在正侧, 来自中国海南的沉香精油样本聚集在负侧。沿 X 轴在 PC1 的散点图上, 老挝和印度尼西亚等东南亚国家的沉香精油样本主要聚集在正侧, 而中国广西的样本集中在中心区域。综上, PCA 在区分提取方式上效果显著, 但在区分地理来源时存在重叠, 例如来自中国广西、中国香港产地的样品与东南亚样品较为相近, 这可能与样品间化学成分

表6 不同产地和不同提取方式沉香精油样品在电子鼻传感器 (N1~N14) 上的响应值比较 ($\bar{x} \pm s$)
Table 6 Response values on electronic nose sensors (N1—N14) for AEO samples from different origins and extraction methods ($\bar{x} \pm s$)

产地	响应值						
	N1	N2	N3	N4	N5	N6	N7
中国海南 (n=13)	0.209±0.117 ^{△▽}	0.186±0.107	0.011±0.002	0.185±0.160	0.138±0.083	0.129±0.056	0.036±0.025
中国广东、香港 (n=18)	0.137±0.080 [△]	0.184±0.106	0.010±0.001	0.142±0.119	0.140±0.078	0.140±0.051	0.030±0.018
中国广西 (n=2)	0.164±0.042	0.200±0.023	0.009±0.001	0.143±0.031	0.155±0.013	0.160±0.049	0.033±0.010
东南亚 (n=5)	0.102±0.054 [▽]	0.124±0.035	0.011±0.001	0.093±0.039	0.091±0.024	0.091±0.019	0.021±0.005
产地	响应值						
	N8	N9	N10	N11	N12	N13	N14
中国海南 (n=13)	0.408±0.243 [□]	0.112±0.057	0.096±0.062	0.134±0.078	0.172±0.124	0.125±0.083	0.024±0.010
中国广东、香港 (n=18)	0.254±0.182 [□]	0.118±0.056	0.081±0.056	0.137±0.073	0.144±0.113	0.111±0.074	0.022±0.002
中国广西 (n=2)	0.232±0.057	0.138±0.048	0.083±0.028	0.149±0.018	0.135±0.048	0.101±0.030	0.024±0.003
东南亚 (n=5)	0.210±0.140	0.073±0.020	0.056±0.024	0.089±0.022	0.100±0.041	0.080±0.023	0.022±0.002
提取方式	响应值						
	N1	N2	N3	N4	N5	N6	N7
SDE (n=23)	0.194±0.094 [*]	0.180±0.082	0.011±0.002	0.164±0.122	0.133±0.064	0.131±0.048	0.033±0.019
SFE (n=15)	0.105±0.076 [*]	0.174±0.120	0.010±0.002	0.129±0.133	0.135±0.088	0.130±0.058	0.028±0.021
提取方式	响应值						
	N8	N9	N10	N11	N12	N13	N14
SDE (n=23)	0.378±0.206 [#]	0.114±0.047	0.091±0.047	0.127±0.061	0.158±0.096	0.114±0.065	0.023±0.007
SFE (n=15)	0.180±0.147 [#]	0.107±0.063	0.070±0.063	0.134±0.082	0.131±0.125	0.106±0.081	0.022±0.002

表中数据后标注的不同符号表示在“不同提取方式”或“不同产地”分组内，经单因素方差分析 (ANOVA) 及事后检验 (LSD 法)，组间差异具有统计学意义 ($P < 0.05$)：△表示对于 N1 传感器，中国海南组与中国广东、香港组有显著差异；▽表示对于 N1 传感器，中国海南组与东南亚组有显著差异；□表示对于 N8 传感器，中国海南组与中国广东、香港组相比有显著差异；*表示对于 N1 传感器，SDE 组与 SFE 组相比有显著性差异；#表示对于 N8 传感器，SDE 组与 SFE 组相比有显著性差异。

Different symbols marked after the data in the table denote statistically significant differences ($P < 0.05$) between groups within the “different extraction methods” or “different origins” categories, as determined by one-way analysis of variance (ANOVA) and post-hoc tests (LSD method). For example: △ indicates a statistically significant difference between the Hainan, China group and the Guangdong/Hong Kong, China group for sensor N1; ▽ indicates a statistically significant difference between the Hainan, China group and the Southeast Asia group for sensor N1; □ indicates a statistically significant difference between the Hainan, China group and the Guangdong/Hong Kong, China group for sensor N8; * indicates a statistically significant difference between the SDE group and the SFE group for sensor N1; # indicates a statistically significant difference between the SDE group and the SFE group for sensor N8.

相似性较高有关，也可能是由于该产地样本数量较少所导致。因此，考虑进一步采用 OPLS-DA 可有效消除无关变量干扰，提升分类精度。

2.4 不同沉香精油样品电子鼻数据的 OPLS-DA

2.4.1 电子鼻传感器响应值数据 OPLS-DA 方法

使用 SIMCA 14.1 软件，将收集的 38 个沉香精油随机分为校准数据子集和验证数据子集，将电子鼻响应值数据用于建立 OPLS-DA 模型，并进行模型预测与验证。其中 36 个样本在建模时按已知的信息被分配为不同提取方法和不同产地，对样本的产地和提取方法进行聚类分析；将随机选取的不同提取方式、不同产地的 2 个电子鼻样品数据 (S21 和 S28) 作为未知样本，不设置分组类别，计算预测值并与实际值进行比较，评估判别模型的准确性。

2.4.2 不同产地沉香精油样品 OPLS-DA 分类判别模型的建立

为了更准确地识别沉香精油样本，利用 OPLS-DA 建立了分类判别模型，对沉香精油的产地和提取方法进行区分。在不同产地样品的判别模型中，以中国广东、中国香港、中国海南、中国广西及东南亚 5 大产地对 36 个沉香精油样本数据进行分类，得分散点图如图 5-A 所示。通过得分图可知，OPLS-DA 对于不同产地的沉香精油样本分类效果良好，基本可以将 5 大产地的沉香精油样本区分开，其 $R_x^2 = 0.839$, $R_y^2 = 0.794$, $Q^2 = 0.572 > 0.500$ ，模型解释度和预测能力均良好。结果如图 5-B 所示，200 次置换检验模型验证的 $R^2 = 0.048$ ， $Q^2 = -0.333$ ， Q^2 点的回归线与纵轴相交于原点以下，模型具有有效性；根据 VIP 图并结合载荷图离子加载

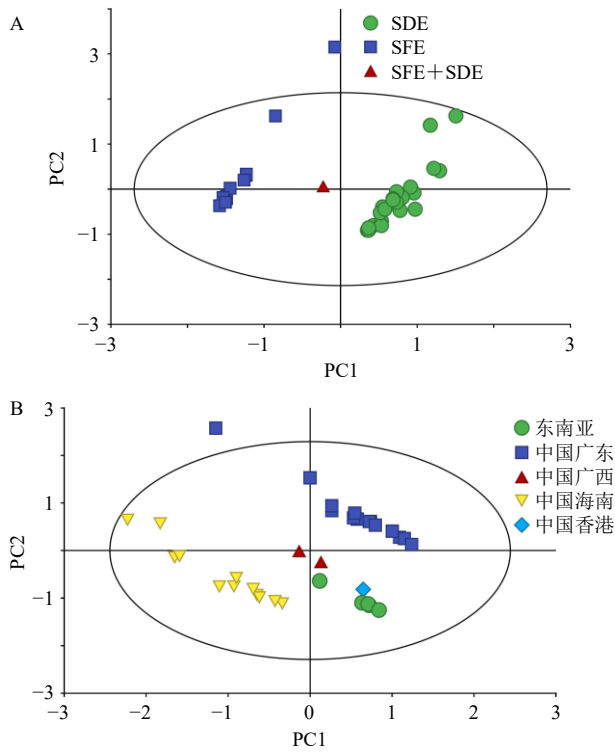


图4 基于不同提取方式 (A) 和不同产地 (B) 的 36 个沉香精油样本的 PCA 散点图

Fig. 4 PCA scatterplot of 36 AEO samples based on different extraction methods (A) and different origins (B)

值越大组间分离程度越强的特点, 筛选出区分 5 组提取方式的主要传感器, 影响显著性排序为 $N8 > N4 > N12$, 结果如图 5-C、D 所示。

2.4.3 不同提取方式沉香精油样品 OPLS-DA 分类判别模型的建立 在不同提取方法的判别模型中, 以 SDE、SFE、SFE+SDE 3 种提取方式对 36 个沉香精油样本数据进行分类。得分散点图如图 6-A 所示, 从得分图可知, 所有沉香精油样本呈现出明显的聚类趋势, 3 种提取方式区分明显, 其 $R^2=0.790$, $R^2=0.647$, $Q^2=0.633 > 0.500$, 模型解释度和预测能力均良好。特别是, 其中有 1 个沉香精油样本是 SDE 与 SFE 混合提取所得的样本, 在得分图中, 可以看到该样本 (S24) 明显与其他 2 种提取方式区分开来, 且处在 2 大类的中间位置, 说明模型对于样本提取方式的判断较为准确, 能够对不同提取方法的样本做出良好的判断。如图 6-B 所示, 200 次置换检验模型验证 $R^2=-0.0279$, $Q^2=-0.2740$, Q^2 点的回归线与纵轴相交于原点以下, 模型具有有效性; 根据 VIP 图并结合载荷图离子加载值越大组间分离程度越强的特点, 筛选出区分 3 组提取方式的 3 种传感器, 影响显著性排序为 $N8 > N1 > N4$, 如

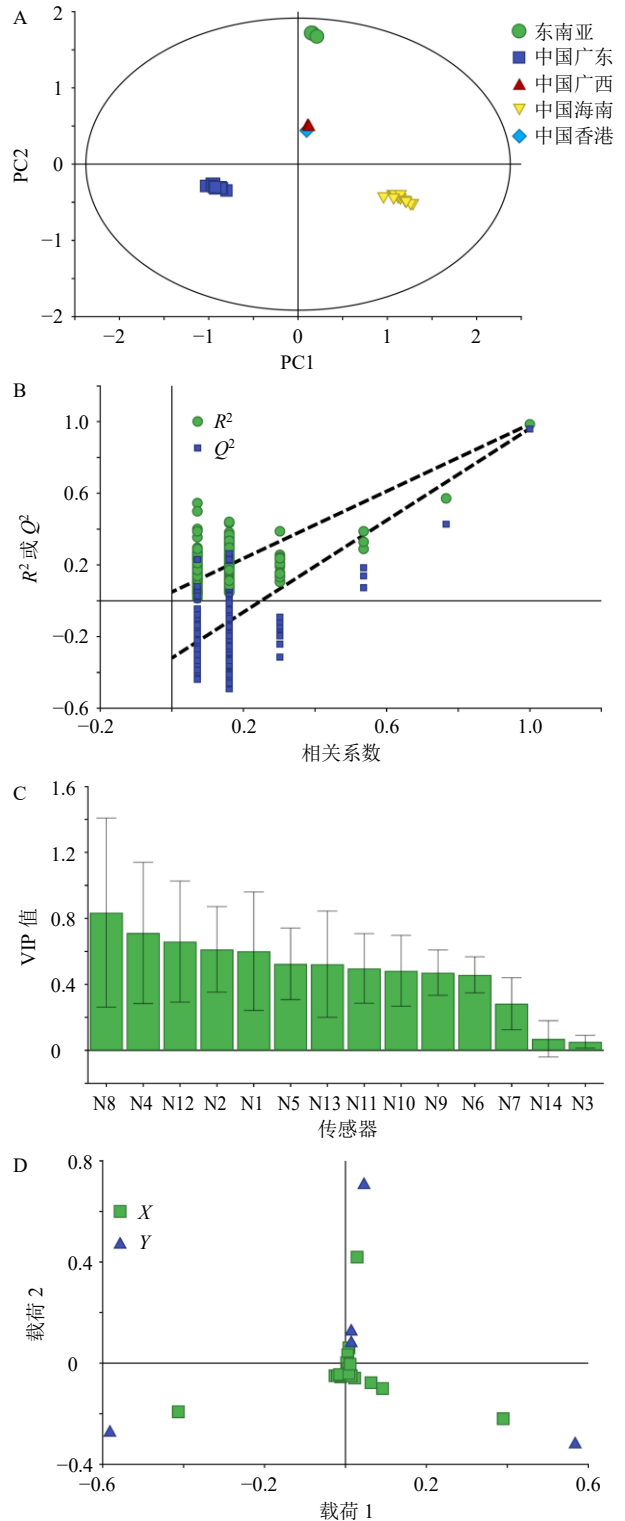


图5 不同产地沉香精油样本的 OPLS-DA 得分图 (A)、200 次置换检验图 (B)、VIP 图 (C) 和载荷图 (D)
Fig. 5 OPLS-DA score plot (A), 200 permutation test plot (B), VIP plot (C) and loadings plot (D) of AEO samples from different origins

图 6-C、D 所示。

2.4.4 模型验证 通过设定 2 个未知样本 (不同产

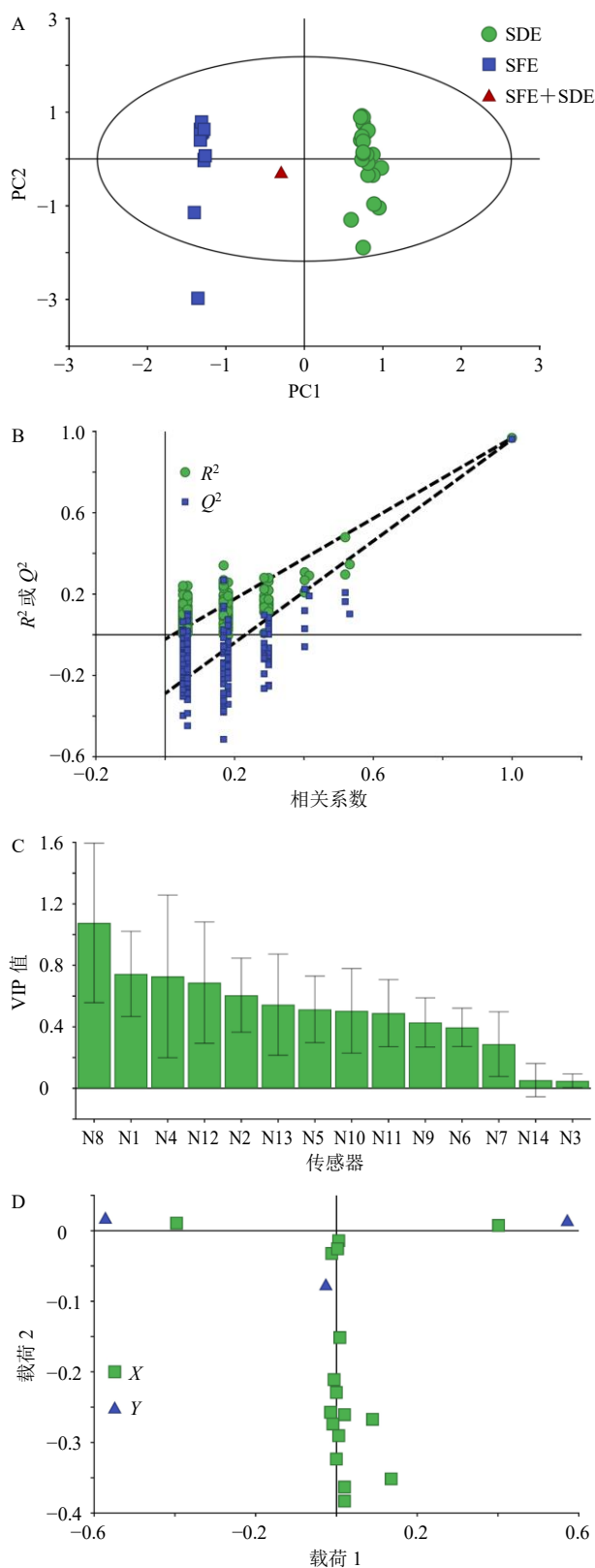


图6 不同提取方式沉香精油样本的 OPLS-DA 得分图 (A)、200 次置换检验图 (B)、VIP 图 (C) 和载荷图 (D)
 Fig. 6 OPLS-DA score plot (A), 200 permutation test plot (B), VIP plot (C) and loadings plot (D) of AEO samples with different extraction methods

地、不同提取方式), 验证该模型对产地、提取方式判定的适用性。其中, S21 的实际产地为中国广东, 模型预测其产地为中国广东, 可能性为 100.00%; S28 的产地为中国海南, 模型预测其产地为中国海南, 可能性为 97.30%。S21 的提取方式为 SFE, 模型预测其提取方式为 SFE, 可能性为 98.74%; S28 的提取方式为 SDE, 模型预测其提取方式为 SDE, 可能性为 98.02%。2 个验证样品的提取方法和产地可以正确识别, 证明电子鼻与 OPLS-DA 相结合可以对沉香精油进行分类判定。

3 讨论

目前, 沉香精油的鉴定主要以气相色谱/质谱联用技术为主, 因其高灵敏度、高分离效能、高选择性等特点而被广泛应用^[31-32]。如 Qian 等^[33]研究发现根据 GC-MS 分析不同提取方法获得的沉香精油的品质是进行质量评价的有效途径。感官评价是挥发油质量评价的另一重要方法, 可通过不同精油样品的特征性气味对其进行判别。本研究首次将电子鼻的快速感官分析能力与 GC-MS 的精确化学成分解析能力相结合, 系统地应用于沉香精油的多维质量评价。该方法不仅实现了对产地和提取方式的准确鉴别, 更重要的是通过 VIP 分析揭示了导致分类差异的关键化合物, 将电子鼻“气味指纹”与 GC-MS 检测所得“化学成分”有效关联。电子鼻模型中 VIP 值最高的传感器 N8 (胺类、挥发性有机化合物敏感)、N4 (有机酸酯和萜类敏感) 和 N1 (芳香族化合物敏感), 其响应模式恰好对应了 GC-MS 筛选出的关键差异化合物的化学类别。本研究通过 VIP 值筛选出沉香精油的关键差异化合物主要为色酮类、去氢呋喃酮、白菖烯、(+)- γ -桉叶油醇、沉香螺醇等, 色酮类主要具有苯环和含氧杂环结构, 白菖烯、(+)- γ -桉叶油醇、沉香螺醇属于倍半萜类, 因此, 其挥发信息可能被 N1 和 N4 共同捕获。而这些化合物主要都是挥发性有机化合物, N8 主要对胺类及挥发性有机化合物敏感, 这些成分的综合挥发特征可能被 N8 传感器特异性响应。因此, 不同产地/工艺沉香精油中关键差异化合物的组成和比例变化, 可被电子鼻传感器阵列以不同的响应值 (即气味指纹) 记录下来, 且主要在 N8、N1、N4 等传感器显示差异性。

从具体的化学成分层面来看, GC-MS 分析结合 OPLS-DA 模型揭示, 2-(2-苯乙基)色酮及其衍生物是区分样品产地与提取方式的最关键标志性化合物。

这一发现与已有研究认为色酮类是沉香关键成分^[34]的结论相一致,并进一步明确了其在溯源与分类中的标志物作用。除此之外,对于提取方式分类而言,去氢呋喃酮、白菖烯、(+)- γ -桉叶油醇、沉香螺醇等为主要差异成分,对于产地分类,3,5-二甲氧基-1,2-二氢萘、沉香螺醇等为主要差异成分。在理论层面,这些成分作为响应产地环境和提取工艺的敏感化学标志物,为从物质基础上理解沉香精油成分、香气特征的差异提供了直接证据。在实践层面,这些VIP值较高的关键差异化合物可作为特征指标成分,用于建立沉香精油产地和工艺溯源的快速检测方法(如基于特定色酮的快速光谱检测),相较于全成分分析,更具针对性和高效性;此外,也可能为制定或完善沉香精油相关的团体/行业质量标准,提供了明确的化学成分指标参考。

从整体的香气指纹层面来看,电子鼻分析结合化学计量学方法,证实了其作为一种快速区分工具的可靠性。PCA虽能有效区分提取方式,但在复杂产地信息解析上存在不足,因此,采用有监督的OPLS-DA算法进行精准建模非常有必要。所建立的OPLS-DA模型显示出良好的解释与预测能力,不仅能清晰区分不同产地的样本,还能对包括混合提取方式在内的不同工艺样本进行准确归类,充分证明了该策略在沉香精油分类与溯源中的实用价值,未来可在实际应用过程中根据模型对未知沉香精油样本进行有效鉴别。除此之外,根据沉香精油电子鼻传感器响应值分析(表6),SDE样本响应值在N1和N8传感器上显著高于SFE样本;中国海南样本响应值在N1传感器上显著高于中国广东、中国香港、东南亚样本,在N8上显著高于中国广东、中国香港样本,本结果也与VIP分析得到的关键传感器结果一致,因此也可通过关键传感器的响应值辅助进行分类判别。未来,本方法有望应用于沉香精油产地溯源、工艺鉴别、批次一致性监控等多个领域。

传统GC-MS技术可对沉香精油成分进行精准的分析,但其耗时、成本高、需复杂前处理,在快速筛查和大样本溯源中应用受限。本研究将电子鼻与化学计量学结合,其与GC-MS的主要区别在于电子鼻可在几分钟内完成样品的“气味指纹”采集,通过预先建立的OPLS-DA模型,即可对未知样品的产地或提取工艺进行快速判定,无需复杂样品制备。当电子鼻判别结果存疑或需要确证时,可启动GC-MS进行精准定性与定量分析。这种“由快至慢、

由粗至精”的分级分析策略,可显著提升分析效率,为名贵中药精油沉香精油的市场快速鉴别提供新思路、新方法。需要指出的是,本研究也存在一定的局限性,例如样本来源虽具代表性,研究建立的OPLS-DA模型经内部200次置换检验验证有效,但其外部预测能力尚需通过更大规模、独立的样本集进行验证,后续研究将纳入更多样品以进一步增强模型稳健性与泛化能力。此外,本研究涉及38个样品的成分鉴定,但由于数据量庞大,成分鉴定主要依据为与质谱库的匹配度(相似度>90%),对于难鉴定的化合物,部分结合了保留指数的文献值进行比对,但对于豆甾醇等难挥发或高沸点化合物,在未进行衍生化且无对照品比对的情况下,仅凭数据库匹配鉴定存在不确定性,这是本研究的局限。后续将进一步开展研究:第一,收集独立验证集进行外部验证;第二,加强对样品基原和提取工艺信息的确认;第三,对关键差异化合物使用对照品匹配,以提升GC-MS鉴定结果的准确性,以期发展成为一套标准化、可推广的沉香精油分类与溯源方案。

利益冲突 所有作者均声明不存在利益冲突

参考文献

- [1] 中国药典 [S]. 一部. 2025: 199-200.
- [2] 梁·陶弘景集,尚志钧辑校. 名医别录 [M]. 北京: 人民卫生出版社, 1986: 64.
- [3] 来银芳, 丁宗妙, 华丽萍, 等. 沉香大健康产品开发进展与展望 [J]. 中草药, 2023, 54(4): 1342-1352.
- [4] Wang S, Wang C H, Yu Z X, *et al.* Agarwood essential oil ameliorates restrain stress-induced anxiety and depression by inhibiting HPA axis hyperactivity [J]. *Int J Mol Sci*, 2018, 19(11): 3468.
- [5] Wang S, Wang C H, Peng D Q, *et al.* Agarwood essential oil displays sedative-hypnotic effects through the GABAergic system [J]. *Molecules*, 2017, 22(12): 2190.
- [6] Wang M R, Li W, Luo S, *et al.* GC-MS study of the chemical components of different *Aquilaria sinensis* (Lour.) gilgorgans and agarwood from different Asian countries [J]. *Molecules*, 2018, 23(9): 2168.
- [7] Zhang Z Y, Chen M Y, Xu J P, *et al.* Exploring the mechanism of quercetin in Ershi-Wei Chenxiang Pills (ECP) on stroke treatment by network pharmacology and experimental validation [J]. *Pharm Chem J*, 2025, 59(3): 275-284.
- [8] 侯金良, 张媛媛, 张浩, 等. 沉香片剂小鼠口鼻吸入给药抗焦虑和催眠功效实验研究 [J]. 山东中医药大学学报, 2021, 45(1): 113-119.

- [9] 费程浩, 戴辉, 苏杭, 等. 电子鼻技术的研究进展及其在中药行业中的应用 [J]. 世界中医药, 2019, 14(2): 257-262.
- [10] 杨柳青, 李辉, 任刚. 基于 GC-MS 技术分析 4 个主产地沉香燃香烟气成分差异 [J/OL]. 中成药, (2025-05-13) [2025-12-22]. <https://link.cnki.net/urlid/31.1368.R.20250513.0941.002>.
- [11] 戴伟杰, 李一峰, 陈志韶, 等. 不同溶剂及提取方式对沉香精油成分的影响 [J]. 药物评价研究, 2022, 45(8): 1597-1607.
- [12] 冯文豪, 田亮玉, 施钧瀚, 等. 电子鼻技术应用于川贝母真伪及规格辨识的可行性分析 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2021, 27(13): 108-118.
- [13] Gaggiotti S, Palmieri S, Della Pelle F, *et al.* Piezoelectric peptide-hpDNA based electronic nose for the detection of terpenes; Evaluation of the aroma profile in different *Cannabis sativa* L. (Hemp) samples [J]. *Sens Actuat B Chem*, 2020, 308: 127697.
- [14] 商杰, 彭嘉玉, 郑郁清, 等. 基于电子鼻和 HS-GC-MS 技术结合相对气味活度值分析甘草不同炮制品气味差异及其物质基础 [J]. 中国中药杂志, 2024, 49(19): 5218-5228.
- [15] 汪豆豆, 邢通, 赵良, 等. 光照强度和空气暴露对大豆油感官品质、氧化程度和脂肪酸组成的影响 [J/OL]. 南京农业大学学报, (2026-01-15) [2026-05-20]. <https://link.cnki.net/urlid/32.1148.S.20260114.1650.006>.
- [16] Zhang B H, Wang Y, Wang J P, *et al.* The establishment of ham grade, sensory scores and key flavor substances prediction models for Jinhua ham via E-nose combined with machine learning [J]. *Food Chem*, 2025, 472: 142847.
- [17] Mahanti N K, Shivashankar S, Chhetri K B, *et al.* Enhancing food authentication through E-nose and E-tongue technologies: Current trends and future directions [J]. *Trends Food Sci Technol*, 2024, 150: 104574.
- [18] Shi X Y, Li Y, Huang D J, *et al.* Characterization and discrimination of volatile compounds in roasted Arabica coffee beans from different origins by combining GC-TOFMS, GC-IMS, and GC-E-Nose [J]. *Food Chem*, 2025, 481: 144079.
- [19] 宋虹, 李一雪, 李然, 等. 顶空固相微萃取/气质联用技术结合电子鼻分析类干酪乳杆菌发酵豆渣饮料过程中风味特征 [J]. 食品与发酵工业, 2023, 49(5): 253-260.
- [20] 付莉, 王小燕, 夏杰, 等. 基于电子鼻和 HS-GC-MS 技术分析不同炮制程度阿胶珠挥发性成分差异 [J]. 中草药, 2025, 56(22): 8102-8112.
- [21] 肖清蓉, 钟凌云, 吴苏容, 等. 基于电子鼻结合 HS-GC-MS 技术分析北苍术麸炒过程中挥发性成分差异 [J]. 中草药, 2025, 56(21): 7713-7724.
- [22] 王艳, 钟凌云, 叶焱蓉, 等. 基于电子鼻和 HS-GC-MS 技术结合 STEM 聚类法分析黄芪蜜炙过程中挥发性成分的动态变化 [J]. 中草药, 2025, 56(24): 8921-8931.
- [23] Chen S J, He W T, Li D M, *et al.* Research on odor prediction methods for coal spontaneous combustion based on E-nose technology [J]. *Sci Rep*, 2026, 16: 942.
- [24] Balivo A, Sacchi R, Di Francia A, *et al.* E-nose analysis of milk to detect the inclusion of hydroponic barley forage in the buffalo diet [J]. *J Food Compos Anal*, 2024, 131: 106230.
- [25] Wu Y F, Zhang L, Liu J X, *et al.* Monitoring environmental tobacco smoke (ETS) by smart E-nose: A review [J]. *IEEE Sens J*, 2025, 25(19): 35659-35671.
- [26] Yang H D, Huang X Y, Yang M, *et al.* Advanced analytical techniques for authenticity identification and quality evaluation in essential oils: A review [J]. *Food Chem*, 2024, 451: 139340.
- [27] Alim A, Huang C F, Zhao X, *et al.* GC-IMS/GC-MS/E-nose and molecular simulation analysis of the effects of aging duration on the aroma of *Citri Reticulatae Pericarpium* and its associated antidepressant effects [J]. *J Agric Food Res*, 2025, 24: 102359.
- [28] 赵玉珍, 解泽阳, 高乐, 等. 基于 HS-GC-MS 和电子鼻技术的不同产地旋覆花挥发性成分差异分析 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2024, 30(16): 170-176.
- [29] 辛力, 温佳文, 龚文慧, 等. 基于 HS-GC-MS 及智能感官技术分析赤石脂炒陈皮炮制前后的挥发性成分差异 [J]. 中国实验方剂学杂志, 2025, 31(7): 157-162.
- [30] 温英丽, 罗茵, 许淑清, 等. 不同类型电子鼻在中药质量评价研究中的应用 [J]. 中国现代中药, 2021, 23(12): 2201-2208.
- [31] Li J, Yu L W, Liang Y C, *et al.* Chemical analysis of different parts from agarwood columns by artificially agarwood-inducing method based on GC-MS and UPLC-TOF-MS [J]. *Fitoterapia*, 2024, 178: 106156.
- [32] 翁良娜, 吴晓鹏, 张群, 等. 大马士革玫瑰精油 GC-MS 分析条件优化及成分鉴定 [J]. 香料香精化妆品, 2022(4): 1-7.
- [33] Qian S Z, Jiang Y M, Yan Q L, *et al.* Visualization OPLS class models of GC-MS-based metabolomics data for identifying agarwood essential oil extracted by hydro-distillation [J]. *Sci Rep*, 2025, 15: 5421.
- [34] Mailina J, Sahrim L, Farah Fatimah A, *et al.* Agarwood essential oil quality and antioxidant properties of *Aquilaria malaccensis* and *Aquilaria sinensis* [J]. *J Trop For Sci*, 2025, 37: 132-143.